

Титоров Д.Б.
Физико-технический институт УрО РАН,
г. Ижевск
titorovdb@mail.ru

НЕОБЫЧНЫЕ УПРУГИЕ ДЕФОРМАЦИИ МАТЕРИАЛОВ НА АТОМНОМ УРОВНЕ

В последние десятилетия в различных странах проводятся исследования, направленные на изучение и использование материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона [1, 2]. В 2012 г. в Nature Materials – журнале по материаловедению с наибольшим импакт-фактором (в 2012 году у Nature Materials – 35,749, у журнала «Материаловедение» – 0,169) появилось исследование, в котором рассматривается возможность создания метаматериала с отрицательным удлинением [3]. Авторы [3] обосновывают свое предположение энергетическими расчетами. По их предположению при растяжении такого материала разрываются слабые связи между частицами. Зато открывается возможность действия сильных связей, которое и приводит к укорочению объекта при внешних силах, которые его растягивают. Авторы отмечают, что на вопрос о том, какой механизм может обеспечивать отрицательное удлинение, у них нет ответа.

В исследованиях материалов на атомном уровне используется квантовая механика, в которой принцип неопределенности является базовым. С ним связана неопределенность размеров атомов, межатомных сил и взаимодействий, и в итоге слабая связь современных физических моделей и теорий конденсированного вещества с материаловедением. И исследований механизма упругости на атомном уровне автор не нашел.

В данном докладе механизм упругой деформации рассматривается на атомном уровне с использованием комбинированного квантово-классического подхода к моделированию атомов и межатомных связей. Такой подход основан на учете фундаментального факта: совершенно точной определенности координат атома в конденсированном веществе. И на нейтральности атомов – тоже фундаментальном экспериментальном факте, который свидетельствует об определенности размеров атомов. За границей атома полей его протонов и электронов нет. Нейтральность атомов обеспечивает зарядовая сфера, на которой равномерно распределен заряд внешних электронов. Внутренние электроны нейтрализуют оставшиеся протоны.

При сближении атомов формируются области парного взаимного проникновения (ПВП), которые ограничены проникшими куполами зарядовых сфер. Притяжение между ядрами и проникшими куполами обеспечивает сцепление (связь, соединение) атомов. Каждое ядро притягивает к себе все купола и, соответственно, все проникшие в него атомы. Поскольку заряд на куполах отрицательный между проникшими в один атом куполами действуют силы отталкивания. Взаимодействие межатомных сил обеспечивает самоорганизацию атомов в веществе [4, 5].

Области ПВП вместе с оболочками внешних электронов, зарядовыми сферами и проникшими куполами составляют электронный каркас (ЭК) конденсированного вещества. ЭК объединяет все атомы, и с ним связаны все свойства конденсированного вещества, которых нет у отдельных атомов. Внешние воздействия изменяют ЭК и этим обуславливают изменения свойств конденсированного вещества.

В работе показано, как при изменении направления внешних сил с изменением электронных каркасов (ЭК) квадратной атомарной ячейки кубических решеток и гексагональной ячейки графена возникает свойство ауксетика (отрицательный коэффициент Пуассона).

В работе предложены сложные атомарные ячейки, способные укорачиваться в направлении растягивающей внешней силы и, наоборот, удлиняться в направлении сжимающей внешней силы. Во-первых, как предполагали авторы [3], при растяжении разрываются одни связи, и включаются другие, противоположные растяжению, но не между разными частицами метаматериала, а между разными атомами. В других атомарных ячейках в результате сжатия появляются новые области ПВП и вместе с ними межатомные силы, действующие в направлении обратном силам сжатия. В комплексе такие ячейки, возможно, могут обеспечить циклические деформации конденсированного вещества: сжатие – растяжение – сжатие – растяжение и т. д.

В процессе деформации изменяется ЭК конденсированного вещества и с ним изменяются и электрические, магнитные и другие свойства. Учет разнообразия изменения структуры и электронного каркаса атомарных ячеек в конденсированных веществах при упругих деформациях можно будет использовать для решения технических задач.

Список источников

1. Конёк Д.А.1, Войцеховски К.В., Плескачевский Ю.М., Шилько С.В. Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона (обзор). Ме-

ханика композитных материалов и конструкций. М., 2004. Т 10, № 1. С. 35–69.

2. Liu Q. Literature Review: Materials with Negative Poisson's Ratios and Potential Applications to Aerospace and Defence. Published by DSTO (Defence Science and Technology Organisation) // Commonwealth of Australia, August 2006.

3. Zachary G. Nicolaou & Adilson E Mechanical metamaterials with negative compressibility transitions // Nature Materials. 2012. № 11(7). P. 608–613.

4. Титоров Д.Б. Материаловедение. Самоорганизация атомов в наноструктуры. 2011. № 12. С. 2–11.

5. Titorov Dmitriy Self-organization of atoms into nanosystems, JCCE. // J. of Chemistry and Chemical Engineering. 2012. Vol. 6. № 9, September. P. 809–813.